

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 26.07.2023 14:16:39

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Modeling and Simulation of Metallic Glasses / Моделирование свойств металлических стекол

Закреплена за подразделением

Кафедра металловедения цветных металлов

Направление подготовки

22.04.02 МЕТАЛЛУРГИЯ

Профиль

Advanced Metallic Materials and Engineering / Современные металлические материалы и инжиниринг

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

4 ЗЕТ

Часов по учебному плану

144

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 3

аудиторные занятия

24

самостоятельная работа

66

часов на контроль

54

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	19			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Практические	24	24	24	24
Итого ауд.	24	24	24	24
Контактная работа	24	24	24	24
Сам. работа	66	66	66	66
Часы на контроль	54	54	54	54
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

*к.т.н., доц., Чурюмов А.Ю.*

Рабочая программа

**Modeling and Simulation of Metallic Glasses / Моделирование свойств металлических стекол**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 22.04.02 МЕТАЛЛУРГИЯ (приказ от 05.03.2020 г. № 95 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.04.02 Металлургия, 22.04.02-ММТ-22-10А.plx Advanced Metallic Materials and Engineering / Современные металлические материалы и инжиниринг, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.04.02 Металлургия, Advanced Metallic Materials and Engineering / Современные металлические материалы и инжиниринг, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра металловедения цветных металлов**

Протокол от 20.06.2022 г., №10

Руководитель подразделения Солонин А.Н.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Целью освоения дисциплины Моделирование свойств металлических стекол является
1.2	- формирование у студентов знаний, умений и навыков моделирования структуры и свойств металлических стекол, в том числе проведение расчетов деформационного поведения этих материалов и прогнозирование оптимальных состава и технологии обработки для получения заданного уровня механических и физических свойств.

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.03
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Metallic materials: structure, properties and application / Металлические материалы: структура, свойства и применение	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Scientific research / Научно-исследовательская практика (преддипломная)	
2.2.2	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

**ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в отрасли металлургии и смежных областях**

**Знать:**

ОПК-5-31 Основные методы моделирования структуры и свойств металлических стекол

**Уметь:**

ОПК-5-У1 Использовать современное программное обеспечение для расчета структуры и свойств металлических стекол

**Владеть:**

ОПК-5-В1 Навыками определения перспективных составов, способных к формированию аморфной структуры

**4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ**

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Основные методы моделирования структуры и свойств металлических стекол</b>							
1.1	Расчет критериев стеклообразующей способности по энтальпии смешения, энтропии, разницы в электроотрицательности элементов и атомных размеров. Экспериментальное определение показателей стеклообразующей способности. /Пр/	3	4	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Расчет критериев стеклообразующей способности по энтальпии смешения, энтропии, разницы в электроотрицательности элементов и атомных размеров. Экспериментальное определение показателей стеклообразующей способности.		

1.2	Построение регрессионной модели связи теоретических критериев и экспериментальных показателей стеклообразующей способности. /Ср/	3	12	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Построение регрессионной модели связи теоретических критериев и экспериментальных показателей стеклообразующей способности.		
	<b>Раздел 2. Моделирование стеклообразующей способности металлических стекол</b>							
2.1	Экспериментальное определение показателей стеклообразующей способности. Построение регрессионной модели связи теоретических критериев и экспериментальных показателей стеклообразующей способности. /Пр/	3	8	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Экспериментальное определение показателей стеклообразующей способности. Построение регрессионной модели связи теоретических критериев и экспериментальных показателей стеклообразующей способности.		
2.2	Расчет критериев стеклообразующей способности по энтальпии смешения, энтропии, разницы в электроотрицательности элементов и атомных размеров. /Ср/	3	10	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Расчет критериев стеклообразующей способности по энтальпии смешения, энтропии, разницы в электроотрицательности элементов и атомных размеров.		
	<b>Раздел 3. Моделирование поведения металлических стекол при кристаллизации</b>							
3.1	Проведение термодинамических расчетов температур фазовых превращений металлических стекол. /Ср/	3	10	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Проведение термодинамических расчетов температур фазовых превращений металлических стекол.		

3.2	Расчет процесса охлаждения расплава с применением метода конечных элементов. /Пр/	3	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Расчет процесса охлаждения расплава с применением метода конечных элементов.		
3.3	Расчет атомной структуры сплавов после кристаллизации с применением метода молекулярной динамики /Пр/	3	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Расчет атомной структуры сплавов после кристаллизации с применением метода молекулярной динамики		
	<b>Раздел 4. Моделирование распространения полос сдвига в металлических стеклах при деформации</b>							
4.1	Построение конечно-элементной модели металлического стекла, содержащего полосу сдвига. /Пр/	3	4	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Построение конечно-элементной модели металлического стекла, содержащего полосу сдвига.		
4.2	Моделирование процесса взаимодействия полос сдвига при деформации с препятствиями с кристаллической структурой /Ср/	3	14	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Моделирование процесса взаимодействия полос сдвига при деформации с препятствиями с кристаллической структурой		
	<b>Раздел 5. Применение искусственных нейронных сетей для расчета свойств металлических стекол</b>							
5.1	Формирование базы данных свойств металлических стекол /Ср/	3	20	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Формирование базы данных свойств металлических стекол		

5.2	Построение моделей связи свойств металлических стекол с их составом, основанных на искусственных нейронных сетях /Пр/	3	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Построение моделей связи свойств металлических стекол с их составом, основанных на искусственных нейронных сетях		
5.3	Сравнительный анализ предсказательной способности моделей /Пр/	3	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1		Сравнительный анализ предсказательной способности моделей		

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### 5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Контрольная работа №1	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-В1	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Как рассчитать критерий стеклообразующей способности сплавов несоответствие размеров атомов (<math>\delta</math>)?</li> <li>2. Как рассчитать критерий стеклообразующей способности сплавов энтальпию смешения (<math>\Delta H_{mix}</math>)?</li> <li>3. Как рассчитать критерий стеклообразующей способности сплавов энтропию смешения (<math>\Delta S_{mix}</math>)?</li> <li>4. Как рассчитать критерий стеклообразующей способности сплавов разность электроотрицательностей (<math>\Delta \chi</math>)?</li> <li>5. Каким методом можно экспериментальной определить стеклообразующую способность?</li> <li>6. Назовите косвенные характеристики стеклообразующей способности.</li> <li>7. Как с использованием дифференциальной сканирующей калориметрии можно сравнить стеклообразующую способность сплавов?</li> </ol>
КМ2	Контрольная работа №2	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-В1	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Опишите методику определения эффективной энергии кристаллизации аморфных металлических материалов.</li> <li>2. Какие основные механические свойства характеризуют прочность аморфных металлических материалов?</li> <li>3. Методы исследования структуры и свойств металлических материалов.</li> <li>4. Опишите методику моделирования процесса деформации металлических стекол.</li> <li>5. Опишите методику построения искусственных нейронных сетей для расчета свойств аморфных металлических материалов.</li> </ol>

#### 5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (модулю, практике, НИР) - эссе, рефераты, практические и расчетно-графические работы, курсовые работы, проекты и др.

#### 5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

#### 5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

### 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

#### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Deform v11.0
-----	--------------

П.2	ANSYS Academic Research CFD	
<b>6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных</b>		
<b>7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ</b>		
Ауд.	Назначение	Оснащение
К-307	Лаборатория	установка для измерения удельной электропроводности ИЭ-1; весы с точностью измерения до четвертого знака после запятой; калориметр DTA/DSC Setaram; дилатометр Linseis L75; установка для лазерной сварки/пайки/напайки МУЛ-1 Л 200
К-317	Лаборатория	Световые металлографические микроскопы 16 шт. , пакет лицензионных программ MS Office, набор демонстрационного оборудования: доска, экран, комплект учебной мебели
<b>8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ</b>		